

Optimización dinámica de una columna de destilación por lotes mediante métodos rigurosos

Jonathan Moreno Narváez*

**Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de los Andes, Bogotá D.C., Colombia*

RESUMEN:

La destilación por lotes es quizá la operación más antigua usada para separar mezclas líquidas. Ésta es usada para la producción a pequeña y gran escala de productos químicos finos y productos especializados. Dada la importancia que tiene este proceso, se desea modelar y optimizar la operación de la misma. Para la simulación dinámica, se aproxima a múltiples estados cuasi-estacionarios consecutivos. Los perfiles obtenidos tras la programación en *Matlab*® son los que se esperan de acuerdo a la literatura, reportes experimentales y datos arrojados por *Aspen Batch Distillation*®. Se logra ver tras la simulación dinámica porque este tipo de destilación presenta ventajas en mezclas multicomponentes que se producen a baja escala. Además se puede ver cuál es la incidencia que tiene incluir la no idealidad a la mezcla de trabajo en los resultados de la simulación dinámica. Finalmente se plantearon dos funciones objetivo: la maximización del flujo de destilado en el tiempo de operación (una hora) y la minimización de una función de costos. Sin importar cuál sea la función objetivo se tiene un problema de optimización dinámica que se convierte a un problema de programación no lineal (NLP) tras la discretización a lo largo del tiempo de operación. Luego de realizar la optimización para cada una de las funciones objetivo, se llegaron a unas respuestas que fueron posteriormente puestas a prueba con un análisis post-optimal que básicamente consistió en un análisis de sensibilidad de los perfiles obtenidos en ambos casos.

ABSTRACT:

Batch distillation is maybe the oldest separation operation used for separate liquid blends. This is used for the output in small and big scale of chemical products with high quality and specific products. Given the importance of that process, want to model and optimize its operation. Dynamic simulation is approached to multiple state successive quasi-stationaries. Profiles obtained later programming in *Matlab*® are agree with profiles presented in literature, experimental reports and simulation results in *Aspen Batch Distillation*®. After dynamic simulation can see why this type of distillation presents advantages in multi-component mixtures produced in small scale. Moreover, can see in the dynamic simulation results, what is the effect of including the non-ideality to the mix of work. Finally, there are two objective functions: maximizing of distillate flow in the operation time (one hour) y minimizing a cost function. For any objective function, the dynamic optimization problem becomes to nonlinear problem, after discretizing along the operation time. After performing the optimization, an answer was obtained for each optimization problem. These answers were testing with post-optimal analysis which basically consisted of a sensitivity analysis when manipulating profiles in both cases.

1 INTRODUCCIÓN

La destilación por lotes es quizá la operación más antigua usada para separar mezclas líquidas. Durante muchos años e incluso hoy en día, ésta, es

comúnmente usada para la producción a pequeña, y gran escala de productos químicos finos y productos especializados como bebidas alcohólicas, aceites esenciales, perfumes, productos farmacéuticos y derivados del petróleo.

Existen varias ventajas al trabajar en columnas de destilación por lotes, una de ellas es que puede separar ciertas mezclas con una sola columna mientras que con la destilación continua es necesario el uso de un tren de columnas de destilación. (Seader, 2006) Otra ventaja importante es la posibilidad de incluir dentro de la alimentación materiales sólidos (Alquitranes o resinas), algo que en la destilación continua presenta problemas. Con la destilación por lotes además, se puede separar mezclas multicomponentes, de alta viscosidad y baja volatilidad entre ellos.

Durante varios años atrás se han presentado diversos trabajos acerca de modelos matemáticos en línea con el desarrollo de métodos numéricos, que permiten modelar el comportamiento de éstas columnas de destilación realizando ciertas simplificaciones según lo refinado que se desee el modelo (Mujtaba, 2004). Adicional a lo anterior, se ha venido trabajando arduamente en la formulación y solución de problemas de optimización dinámica para diseño, control y operación óptima de dichas columnas. Muestra de lo anterior se puede evidenciar en los múltiples enfoques con los cuales diversos autores abordan estos temas, cabe mencionar, por ejemplo, el uso de redes neurológicas artificiales en la modelación, optimización y control dinámico. (Mujtaba, 2004)

Considerando lo anterior, este trabajo pretende estudiar y formular el problema de optimización dinámica para el control y operación óptima de una columna de destilación por lotes mediante métodos rigurosos, los cuales están basados en balances diferenciales de materia y energía, relaciones de equilibrio termodinámico, configuración y especificaciones de la columna. Este problema tiene una importante complejidad matemática y computacional, debido a que para la simple simulación de la columna se debe resolver un conjunto de ecuaciones algebraicas y diferenciales (DAE), la resolución de la simulación se puede realizar mediante la discretización de las ecuaciones diferenciales, y resolviendo de forma secuencial en pequeños instantes de tiempo el conjunto de ecuaciones algebraicas que resultan de la discretización. Otro posible método de resolución, consiste en suponer estados cuasi-equilibrio que permiten resolver sucesivos modelos estables de la torre, adaptando la composición de la mezcla alimentada en cada cuasi-equilibrio planteado. Una

vez hecha la simulación de la columna, para planear el problema de optimización, y resolverlo se deben considerar algunos conceptos matemáticos adicionales tales como el principio el mínimo de Pontryagin, función Hamiltoniana, condiciones de optimalidad necesarias, entre otros. Actualmente, existe una producción considerable de investigaciones doctorales que abordan este tema, tratando de encontrar un método de resolución eficiente para este problema de optimización.

El problema dinámico puede ser resuelto aplicando uno de los siguientes algoritmos de búsqueda, tras la aplicación de algún principio de optimización (Arias Barreto, Rodríguez-Donis, Gerbaud, & Joulia, 2010):

- Lagrangiano incrementado
- Gradiente reducido generalizado (GRG)
- Programación cuadrática sucesiva (SQP)

Todas las técnicas de optimización anteriores son métodos determinísticos. Pero los métodos de optimización estocásticos son populares, dentro de los que se encuentran los métodos basados en algoritmos genéticos y métodos de recocido simulado (*simulated annealing*) (Arias Barreto, Rodríguez-Donis, Gerbaud, & Joulia, 2010).

Como caso de estudio se tratará la mezcla equimolar propano, butano, pentano y hexano, que inicialmente se supondrá mezcla ideal, y posteriormente se agregará la no idealidad de la fase líquida con el cálculo del coeficiente de actividad por medio del modelo NRTL.

1.1 Destilación por lotes

La configuración del sistema consiste en un rehervidor parcial, una columna con N platos (etapas) en equilibrio, y un condensador total con reflujo. (Seader, 2006)

Para el desarrollo del modelo matemático, con la configuración de la columna de destilación descrita en la *ilustración 1*, se consideran las siguientes suposiciones:

1. La retención molar de vapor es despreciable en comparación con la retención molar del líquido (Morel, 2008).
2. El vapor y el líquido sobre cada uno de los platos está perfectamente mezclado, y la

concentración del líquido sobre el plato es la misma que la del líquido que abandona el plato (Morel, 2008).

3. Las composiciones teóricas en equilibrio son correctas para efectos de mezclado, configuración del flujo, y limitaciones de transferencia de masa (Morel, 2008).
4. La columna de destilación por lotes opera a presión atmosférica constante a lo largo de la misma.
5. La retención de líquido en los platos es constante.
6. La retención de líquido para el condensador es nula.
7. La columna se supone adiabática.
8. Eficiencia de plato se supone igual a 1.

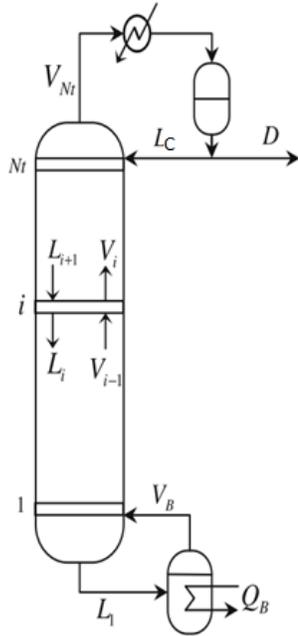


Ilustración 1. Configuración de la columna de destilación por lotes (Morel, 2008)

Las ecuaciones que se presentan a continuación, son los balances diferenciales de masa y energía, relaciones de equilibrio y relaciones empíricas para la simulación de una columna de destilación por lotes. También se incluyen las simplificaciones presentadas anteriormente.

1.1.1 Balance molar total

1.1.1.1 Rehervidor

$$\frac{dM_B}{dt} = -L_C R \quad (1)$$

Al discretizar la ecuación anterior, se obtiene:

$$-L_C^j R h = M_B^{j+1} - M_B^j \quad (2)$$

1.1.1.2 Platos

$$L_2 + V_B - L_1 - V_1 = 0 \quad (3)$$

$$L_0 + V_{NT-1} - L_{NT} - V_{NT} = 0 \quad (4)$$

$$L_{j+1} + V_{j-1} - L_j - V_j = 0 \quad j = 2: NT - 1 \quad (5)$$

1.1.1.3 Condensador

$$L_C(1/R + 1) - V_{NT} = 0 \quad (6)$$

1.1.2 Balance de Molar parcial

1.1.2.1 Condensador

$$y_{i,NT} = x_{i,D} \quad i = 1:C \quad (7)$$

1.1.2.1 Rehervidor

La ecuación ya discretizada es la que se presenta a continuación:

$$x_{i,B}^{j+1} = (M_B^j x_{i,B}^j - L_C^j R h x_{i,c}^j) / (M_B^j - L_C^j R h) \quad i = 1:C \quad (8)$$

1.1.2.2 Platos

$$\frac{dx_{i,j}}{dt} = \frac{V_{j-1} y_{i,j-1} + L_{j+1} x_{i,j+1} - V_j y_{i,j} - x_{i,j} L_j}{M_j} \quad i = 1:C \quad j = 2: NT - 1 \quad (9)$$

$$\frac{dx_{i,1}}{dt} = \frac{V_B y_{i,B} + L_2 x_{i,2} - V_1 y_{i,1} - x_{i,1} L_1}{M_1} \quad i = 1:C \quad (10)$$

$$\frac{dx_{i,NT}}{dt} = \frac{V_{NT-1} y_{i,NT-1} + L_0 x_{i,0} - V_{NT} y_{i,NT} - x_{i,NT} L_{NT}}{M_{NT}} \quad i = 1:C \quad (11)$$

Por la metodología que se escogió, se tiene la siguiente ecuación:

$$V_{j-1} y_{i,j-1} + L_{j+1} x_{i,j+1} - V_j y_{i,j} - x_{i,j} L_j \quad (12)$$

$$V_B y_{i,B} + L_2 x_{i,2} - V_1 y_{i,1} - x_{i,1} L_1 \quad (13)$$

$$V_{NT-1} y_{i,NT-1} + L_0 x_{i,0} - V_{NT} y_{i,NT} - x_{i,NT} L_{NT} \quad (14)$$

1.1.3 Relación de equilibrio

$$y_{i,j} = K_{i,j} x_{i,j} \quad i = 1:C \quad j = B, 1, 2, 3, \dots, NT \quad (15)$$

1.1.4 Balance de energía

1.1.4.1 Rehervidor

$$Q_B + L_1 h_1^l - V_B h_B^v = h_B^l \frac{dM_B}{dt} + M_B \frac{dh_B^l}{dt} \quad (16)$$

Dado que se trabajarán sistemas en estado cuasi-estacionarios la ecuación anterior se convierte en:

$$Q_B + L_1 h_1^l - V_B h_B^v = h_B^l \frac{dM_B}{dt} \quad (17)$$

1.1.4.2 Condensador

$$0 = V_{NT} h_{NT}^v - Q_c - V_{NT} h_0^l \quad (18)$$

1.1.4.2 Platos

$$\frac{dh_1^l}{dt} = \frac{L_2 h_2^l + V_B h_B^l - V_1 h_1^v - h_1^l L_1}{M_1} \quad (19)$$

$$\frac{dh_{NT}^l}{dt} = \frac{L_0 h_0^l + V_{NT-1} h_{NT-1}^l - V_{NT} h_{NT}^v - h_{NT}^l L_{NT}}{M_{NT}} \quad (20)$$

Con la suposición de sistema cuasi-estacionario se tienen las siguientes ecuaciones:

$$L_2 h_2^l + V_B h_B^l - V_1 h_1^v - h_1^l L_1 = 0 \quad (21)$$

$$L_0 h_0^l + V_{NT-1} h_{NT-1}^l - V_{NT} h_{NT}^v - h_{NT}^l L_{NT} = 0 \quad (22)$$

1.1.5 Sumatoria

1.1.5.1 Platos, Rehervidor y Condensador

$$\sum_{i=1}^C y_{i,j} - \sum_{i=1}^C x_{i,j} = 0 \quad j = 1: NT + 2 \quad (23)$$

1.1.6 Retención

1.1.6.1 Rehervidor

$$M_B(t) = M_B^0 - \sum_{i=1}^{NT} M_i(t) - \int_0^t (L_c(\tau)/R) d\tau \quad (24)$$

$$M_i(t=0) = M_{i,0}$$

1.2 Análisis de grados de libertad

Tabla 1. Análisis de grados de libertad para el rehervidor

Ecuaciones	Variables	Número de variables y ecuaciones
Balances molares parciales	$x_{i,B}$	C*
Relaciones de Equilibrio	$y_{i,B}$	C
Sumatoria	V_B	1
Retención molar del rehervidor	M_B	1
Balance de energía	T_B	1
Total		2C+3

*Es el número de componentes

Tabla 2. Análisis de grados de libertad del condensador

Ecuaciones	Variables	Número de ecuaciones y variables
Balance molar total	Q_c	1
Balance molar parcial	$x_{i,D}$	C*
Equilibrio	$y_{i,c}$	C
Relación de reflujo	L_c	1
Balance de energía	T_c	1
Total		2C+3

*Es el número de componentes

Tabla 3. Análisis de grados de libertad para un plato

Ecuaciones	Variables	Número de ecuaciones y de variables
Balance molar total	L_j	1
Balance Parcial	x_{ij}	C*
Equilibrio	y_{ij}	C
Sumatoria	V_j	1
Balance de Energía	T_j	1
Total		2C+3

*Es el número de componentes

Para la simulación el número total de ecuaciones y de variables es de:

$$NT * (2C + 3) + 2C + 3 + C + 3 = 2 * C * NT + 3 * NT + 3 * C + 6$$

Lo que nos dice que el sistema tiene cero grados de libertad.

$$\alpha_{i,j} = c_{i,j}$$

1.3 Especificaciones

Q_B : Es la potencia del rehervidor GJ/h .

M_B^0 : Es el alimento de la mezcla a separar en kmol

$x_{i,0}$: Composición inicial de la mezcla

P_B : Presión de operación de la columna en bar

NT : Número de platos

R : Relación de Reflujo

Tabla 4. Especificaciones de la columna de destilación por lotes para la simulación dinámica

Especificaciones	Valor
Q_B (GJ/h)	0.25
M_B^0 (Kmol)	10
P_B (bar)	1.01325
$x_{propano,0}$	0.25
$x_{butano,0}$	0.25
$x_{pentano,0}$	0.25
$x_{hexano,0}$	0.25
NT	5
R	1

$K_{i,j}$: Valor k del componente i en la etapa j .

$$P_j y_{i,j} = x_{i,j} P_{i,j}^{sat} \gamma_{i,j} \quad j = B, 1, 2, 3, \dots, NT \quad (25)$$

$$\log_{10} P_{i,j} \text{ (bar)} = A_i - \frac{B_i}{T_j(K) + C_i - 273.25} \quad (26)$$

$$K_{i,j} = \frac{P_j}{P_{i,j}^{sat} \gamma_{i,j}} \quad (27)$$

Modelo NRTL

$$\ln \gamma_i^l = \frac{\sum_j^N \tau_{ji}^l G_{ji}^l x_j}{\sum_k^N G_{ki}^l x_k} + \sum_j^N \frac{x_j G_{ij}^l}{\sum_k^N G_{kj}^l x_k} \left(\tau_{ij}^l - \frac{\sum_k^N x_k \tau_{kj}^l G_{kj}^l}{\sum_k^N G_{kj}^l x_k} \right)$$

$$\tau_{ij} = \frac{b_{ij}}{RT} \quad \tau_{ii} = 0$$

$$G_{ij} = e^{-\alpha_{ij} \tau_{ij}} \quad G_{ii} = 1$$

Tabla 5. Valores de los parámetros para el cálculo del coeficiente de actividad (Aspen Properties®)

Componente i Componente j	Butano Pentano	Butano Hexano	Pentano Hexano
$B_{i,j}$	-264,293	52,951	188,952
$B_{j,i}$	413,7626	-59,4663	-180,425
$C_{i,j}$	0,3	0,3	0,3

Tabla 6. Valores de las constantes de Antoine para las sustancias de trabajo (Poling, Bruce E & Prausnitz, John M, 2001)

Sustancia	A_i	B_i	C_i
Propano	3,92828	803,9970	247,040
Butano	3,93266	935,7730	238,789
Pentano	3,97786	1064,84	232,014
Hexano	4,00139	1170,875	224,317

$M_i(t = 0) = M_{i,0}$: Es la retención molar del plato i en $t = 0$

$\int_0^t (L_c(\tau)/R) d\tau$: Se calcula por medio de integración numérica mediante la siguiente fórmula:

$$\int_0^{t_n} (L_c(\tau)/R) d\tau = \sum_{i=1}^n h((L_c(t_i)/R) + (L_c(t_{i-1})/R))$$

$$h = t_i - t_{i-1}$$

$$\frac{C_p}{R_g} = a_0 + a_1 T + a_2 T^2 + a_3 T^3 + a_4 + T^4 \quad (28)$$

$$h_{v,i} = \sum_{j=1}^C y_{1,i} \left(\int_{T_0}^T (C_p)_{j,v} dT \right) + h_{v,i}^\circ \quad (29)$$

$$h_{l,i} = \sum_{j=1}^C x_{1,i} \left(\left(\int_{T_0}^T (C_p)_{j,v} dT \right) - \Delta H_i^{vap} + h_{l,i}^\circ \right) \quad (30)$$

Tabla 7. Valores para calcular las capacidades calóricas (Poling, Bruce E & Prausnitz, John M, 2001)

Sustancia	a_0	$a_1 10^3$	$a_2 10^5$	$a_3 10^8$	$a_4 10^{11}$
Propano	3,847	5,131	6,011	-7,893	3,079
Butano	5,547	5,536	8,057	-10,571	4,134
Pentano	7,554	-0,368	11,846	-14,939	5,753
Hexano	8,831	-0,166	14,302	-18,314	7,124

Tabla 8. Valores del ΔH_0^{vap} para las sustancias de trabajo (Poling, Bruce E & Prausnitz, John M, 2001)

Sustancia	ΔH_0^{vap} (KJ/mol)
Propano	19,04
Butano	22,44
Pentano	25,79
Hexano	28,85

Tabla 9. Valores de $h_{l,i}^\circ$ y $h_{v,i}^\circ$ para las sustancias de trabajo (Aspen Properties®)

Sustancia	$h_{l,i}^\circ$	$h_{v,i}^\circ$
Propano	-110000	-104750
Butano	-135200	-125900
Pentano	-160100	-146750
Hexano	-184000	-166900

Los valores iniciales a $t = 0$, para todas las variables se obtienen en estado estacionario, suponiendo que no ha salido nada de destilado. Estos valores dependen de Nt (el número de platos), el alimento inicial al rehervidor, la composición de la mezcla alimentada al rehervidor, las retenciones constantes en cada etapa. (Seader, 2006)

Todas las derivadas, excepto la correspondiente a la retención molar en el rehervidor se consideran cero, debido a que se va a resolver el problema de manera cuasi-estacionaria.

Al optimizar la columna de destilación, se tiene un problema de optimización dinámica no lineal, el cual tiene varias aproximaciones matemáticas para su resolución, dentro de las que se encuentran: una vez hecha la simulación de las ecuaciones algebraicas y diferenciales discretizadas, se evalúa cierta función objetivo, y con base en un criterio de búsqueda se varían las variables de decisión de tal manera que se encuentre una mejor respuesta de la función objetivo. Otra aproximación utiliza herramientas matemáticas desarrolladas para el control óptimo tales como el principio del máximo de Pontryagin, y la función Hamiltoniana. Otro enfoque es la discretización del modelo dinámico y posterior aplicación de un algoritmo de resolución de un problema de optimización no lineal. Un enfoque diferente fue reportado por (Mujtaba, 2004), al presentar el concepto de redes neurológicas artificiales.

1.2 Control óptimo

Necesariamente existe cierta interacción entre el diseño y control óptimo.

Básicamente el objetivo de la optimización dinámica del diseño y control, es la creación de un proceso y su control óptimo capaz de mantener un punto de operación del equipo en presencia de perturbaciones externas sobre ciertos intervalos de operación para de tal manera que se maximice (minimice) un criterio económico. (Miranda, Renuaume, Meyer, Meyer, & Szigeti, 2008)

Para resolver el problema de diseño y control óptimo se tienen dos métodos de solución, para el primero el diseño del proceso y control es llevado a cabo aplicando el principio del mínimo de Pontryagin. Las ecuaciones de Euler-Lagrange son derivadas del problema de optimización, las cuales son resueltas usando técnicas de discretización. El anterior método se conoce como el enfoque del control óptimo. De acuerdo con el segundo método, el problema de control óptimo es incluido en las restricciones del problema de diseño, en el cual es resuelto usando cualquier técnica de resolución de problemas de optimización de tipo no lineal (NLP). Este método es llamado el enfoque del diseño óptimo. En ambos casos, la idea de la solución del problema de optimización originalmente de dimensión finita es enfocada a la discretización de las variables de estado y control y el problema de optimización es considerado un horizonte de tiempo finito. (Miranda, Renuaume, Meyer, Meyer, & Szigeti, 2008)

Dada una solución de diseño en estado estacionario, el control óptimo se determina por subsecuentes pasos de optimización. (Miranda, Renuaume, Meyer, Meyer, & Szigeti, 2008)

Formulación del problema de optimización

$$\min_{x(t), x_0, u(t), u_0, d, \xi} w(d) + S(x(t_f), t_f) + \int_{t_0}^{t_f} g_{d^*}(x(t), u(t), t) dt$$

Sujeto a:

$$\dot{x}(t) - f_\theta(x(t), u(t), t, d) = 0$$

$$q_\theta(x(t), u(t), t) \leq 0$$

$$x(t_0) - x_0 = 0$$

$$u(t_0) - u_0 = 0$$

$$x \in X \subset \mathbb{R}^n \quad u \in U \subset \mathbb{R}^m$$

$$x_0 \in X \subset \mathbb{R}^n \quad u_0 \in U \subset \mathbb{R}^m$$

$$d \in D_p \subset \mathbb{R}^q \quad \xi \in Z \subset \mathbb{R}^z$$

$$\forall t \in [t_0, t_f]$$

La función objetivo se minimiza incluyendo el costo de inversión anual $w(d)$ y el costo de operación (control). S es el término terminal del costo de control. Las ecuaciones que se refieren al modelo dinámico del proceso resultan en un conjunto de ecuaciones algebraicas y diferenciales (DAEs), con sus correspondientes condiciones iniciales. (Miranda, Renuaume, Meyer, Meyer, & Szigeti, 2008)

Este modelo utiliza a f_θ para indicar que la variación de $\theta(t)$ la perturbación con el tiempo es conocida y hace parte del problema de diseño, pero ésta en sí misma no es una variable del problema. (Miranda, Renuaume, Meyer, Meyer, & Szigeti, 2008)

1.3 Control y diseño secuencial

Los problemas de optimización de diseño de procesos y los problemas de control eran resueltos de forma separada con un procedimiento de diseño secuencial. (Miranda, Renuaume, Meyer, Meyer, & Szigeti, 2008)

1.3.1 Diseño óptimo

El problema del diseño óptimo en estado estacionario puede ser un problema de programación no lineal (NLP):

$$\max_{\theta} \left(\begin{array}{l} \min_{x_0, u_0, d} w(d) + (t_f - t_0)g(x_0, u_0, d) \\ f_\theta(x_0, u_0, d) = 0 \\ q_\theta(x_0, u_0, d) \leq 0 \\ x_0 \in X \end{array} \right)$$

Donde,

d : Parámetro de diseño

u_0 : Variable de control

x_0 : Variable de estado

θ : Parámetro perturbado

t_f : Tiempo final

t_0 : Tiempo inicial

$f_\theta(\cdot)$: Modelo del proceso

$q_\theta(\cdot)$: Restricciones del proceso

La idea básica de la solución del problema NLP es desarrollar un criterio para minimizar con respecto a la perturbación θ el costo funcional. Muchas veces para simplificar el problema anterior se debe resolver para un valor fijo θ_0 . Secuencialmente, las soluciones óptimas en estado estacionario x_0^*, u_0^*, d^* son usadas para construir la condición inicial del problema de control óptimo cuando los parámetros de diseño están fijos a un conjunto de valores d^* . (Miranda, Renuaume, Meyer, Meyer, & Szigeti, 2008)

1.3.2 Control óptimo

El diseño obtenido en el anterior procedimiento (d^*), es ahora evaluado dinámicamente en la presencia de perturbaciones y con consideraciones de las restricciones del problema de control dinámico. El problema de control puede ser formulado de la siguiente manera: (Miranda, Renuaume, Meyer, Meyer, & Szigeti, 2008)

$$\min_{x(t), u(t)} S(x(t_f), t_f) + \int_{t_0}^{t_f} g_{d^*}(x(t), u(t), t) dt$$

Sujeto a:

$$\dot{x}(t) - f_{\theta, d^*}(x(t), u(t), t) = 0$$

$$q_{\theta, d^*}(x(t), u(t), t) \leq 0$$

$$x(t_0) - x_0^* = 0$$

$$u(t_0) - u_0^* = 0$$

$$x \in X \subset \mathbb{R}^n \quad u \in U \subset \mathbb{R}^m$$

$$\forall t \in [t_0, t_f]$$

El problema de control óptimo definido arriba es resuelto utilizando el principio del mínimo de Pontryagin.

1.4 Control y diseño simultáneo

En la aproximación del diseño y control simultáneo, estos son optimizados simultáneamente. Si se dice que $S(x(t_f), t_f) = 0$, dicho problema se puede formular de la siguiente manera:

$$\min_{x(t), x_0, u(t), u_0, d, \xi} w(d) + \int_{t_0}^{t_f} g_d^*(x(t), u(t), t) dt$$

Sujeto a:

$$\dot{x}(t) - f_{\theta(t)}(x(t), u(t), t, d) = 0$$

$$q_{\theta(t)}(x(t), u(t), t) + \xi^2 = 0$$

$$x(t_0) - x_0 = 0$$

$$u(t_0) - u_0 = 0$$

$$x \in X \subset \mathbb{R}^n \quad u \in U \subset \mathbb{R}^m$$

$$x_0 \in X \subset \mathbb{R}^n \quad u_0 \in U \subset \mathbb{R}^m$$

$$d \in D_p \subset \mathbb{R}^q \quad \xi \in Z \subset \mathbb{R}^z$$

$$t \in [t_0, t_f]$$

ξ : Variables de holgura

Para la solución del problema de optimización planteado anteriormente, dos estrategias son propuestas. En la primera estrategia, el problema de control está incluido en las restricciones del diseño del problema, el cual se puede resolver utilizando SQP. En la segunda estrategia, la optimización del diseño y el control, es llevada a cabo utilizando el principio del máximo de Pontryagin, en donde, la

ecuación de Euler-Lagrange es obtenida de este problema de optimización. Las ecuaciones algebro-diferenciales son discretizadas y resueltas entonces por el método de Newton-Raphson. (Miranda, Renuaume, Meyer, Meyer, & Szigeti, 2008)

1.4.1 Estrategia de diseño optimo

$$\min_{x_0, u_0, d} w(d) + J_0(x_0, u_0, d)$$

Sujeto a:

$$f_{\theta}(x_0, u_0, d) = 0$$

$$q_{\theta}(x_0, u_0, d) \leq 0$$

$$x_0 \in X \subset \mathbb{R}^n \quad u_0 \in U \subset \mathbb{R}^m$$

$$d \in D_p \subset \mathbb{R}^q$$

Dónde:

$$J_0(x_0, u_0, d) = \left(\begin{array}{l} \min_{x(t), u(t), \xi} \int_{t_0}^{t_f} g_d(x(t), u(t), t) dt \\ \text{Sujeto a:} \\ \dot{x}(t) - f_{\theta(t), d}(x(t), u(t), t) = 0 \\ q_{\theta(t), d}(x(t), u(t), t) + \xi^2 = 0 \\ x(t_0) - x_0 = 0 \\ u(t_0) - u_0 = 0 \\ x \in X \subset \mathbb{R}^n \quad u \in U \subset \mathbb{R}^m \\ \xi \in Z \subset \mathbb{R}^z \quad t \in [t_0, t_f] \end{array} \right)$$

El problema anterior representa el problema de control óptimo para las condiciones iniciales conocidas y las variables de diseño dadas. (Miranda, Renuaume, Meyer, Meyer, & Szigeti, 2008)

De acuerdo con el principio del mínimo de Pontryagin, una condición necesaria para la solución óptima del problema anterior está dada por lo siguiente:

Dado $u^*(t)$ que es la trayectoria de control óptima para el problema anterior, y dado $x^*(t)$ la correspondiente trayectoria de estado óptima, entonces existe un conjunto de multiplicadores $(\lambda(t), \varphi(t))$, tales que:

$$\frac{\partial H}{\partial \lambda} = \dot{x}(t) \rightarrow \dot{x}(t) = f_{\theta(t)}(x(t), u(t), d, t)$$

$$\frac{\partial H}{\partial \varphi} = 0 \rightarrow q_{\theta(t)}(x(t), u(t), d, t) + \xi^2 = 0$$

$$\frac{\partial H}{\partial x} = -\dot{\lambda}(t) \rightarrow -\dot{\lambda}(t) = \frac{\partial g}{\partial x} + \lambda^T(t) \frac{\partial f}{\partial x} + \varphi^T(t) \frac{\partial q}{\partial x}$$

$$\frac{\partial H}{\partial u} = 0 \rightarrow 0 = \frac{\partial g}{\partial u} + \lambda^T(t) \frac{\partial f}{\partial u} + \varphi^T(t) \frac{\partial q}{\partial u}$$

$$\frac{\partial H}{\partial \xi} = 0 \rightarrow 2\varphi(t)^T \xi(t) = 0$$

Para todo $t \in [t_0, t_f]$. Las condiciones de frontera de la variable de control y de la variable de estado son añadidas también al conjunto de ecuaciones anteriores. La condición de transversalidad ocurre cuando:

$$(S_x - \lambda(t))\delta x|_{t=t_f} + (H(t) + S_t)\delta t|_{t=t_f} = 0$$

Para todo $t \in [t_0, t_f]$. S_x y S_t son las derivadas del costo terminal con respecto a la variable de estado y el tiempo, δ es un operador infinitesimal y H es el Hamiltoniano, definido como:

$$\begin{aligned} H(x(t), u(t), \lambda(t), \varphi(t), t) \\ = g(x(t), u(t), t) \\ + \lambda^T f_\theta(x(t), u(t), t) \\ + \varphi^T(t)(q_\theta(x(t), u(t), t) + \xi(t)^2) \end{aligned}$$

Si el término del costo terminal S es igual a cero, la condición de transversalidad que resulta es:

$$\lambda(t_f) = 0$$

1.5 Problema de optimización

$$\min_{x(t), x_0, u(t), u_0, d, \xi} w(d) + \int_{t_0}^{t_f} g(x(t), u(t), d, t) dt$$

Sujeto a:

$$f_{\theta_0}(x_0, u_0, d) = 0$$

$$q_{\theta_0}(x_0, u_0, d) \leq 0$$

$$\dot{x}(t) - f_{\theta(t)}(x(t), u(t), t, d) = 0$$

$$q_{\theta(t)}(x(t), u(t), t, d) + \xi^2 = 0$$

$$-\dot{\lambda}(t) = \frac{\partial g}{\partial x} + \lambda^T(t) \frac{\partial f}{\partial x} + \varphi^T(t) \frac{\partial q}{\partial x}$$

$$0 = \frac{\partial g}{\partial u} + \lambda^T(t) \frac{\partial f}{\partial u} + \varphi^T(t) \frac{\partial q}{\partial u}$$

$$2\varphi(t)^T \xi(t) = 0$$

$$\lambda^T(t_f) = 0$$

$$x(t_0) - x_0 = 0$$

$$u(t_0) - u_0 = 0$$

$$x \in X \subset \mathbb{R}^n \quad u \in U \subset \mathbb{R}^m$$

$$x_0 \in X \subset \mathbb{R}^n \quad u_0 \in U \subset \mathbb{R}^m$$

$$d \in D_p \subset \mathbb{R}^q \quad \xi \in Z \subset \mathbb{R}^z$$

$$t \in [t_0, t_f]$$

El problema anterior es un problema de optimización dinámica no lineal con restricciones convertidas en un conjunto de ecuaciones algebraicas y diferenciales (DAE). Varias técnicas de discretización son usadas para transformar este problema en uno de programación no lineal (NLP) que puede ser resuelto por algoritmos de optimización como SQP. Trabajando con el método de SQP, el modelo se puede solucionar en estado estacionario en orden para calcular las condiciones iniciales de las variables de estado, y entonces se calcula el costo funcional resolviendo el problema de control óptimo.

1.6 Estrategia de control óptimo

$$\frac{\partial H}{\partial \lambda} = \dot{x}(t) \rightarrow \dot{x}(t) = f_{\theta(t)}(x(t), u(t), d, t)$$

$$\frac{\partial H}{\partial \varphi} = 0 \rightarrow q_{\theta(t)}(x(t), u(t), d, t) + \xi^2 = 0$$

$$\frac{\partial H}{\partial x} = -\dot{\lambda}(t) \rightarrow -\dot{\lambda}(t) = \frac{\partial g}{\partial x} + \lambda^T(t) \frac{\partial f}{\partial x} + \varphi^T(t) \frac{\partial q}{\partial x}$$

$$\frac{\partial H}{\partial u} = 0 \rightarrow 0 = \frac{\partial g}{\partial u} + \lambda^T(t) \frac{\partial f}{\partial u} + \varphi^T(t) \frac{\partial q}{\partial u}$$

$$\frac{\partial H}{\partial \xi} = 0 \rightarrow 2\varphi(t)^T \xi(t) = 0$$

$$\frac{\partial \omega}{\partial d} + \int_{t_0}^{t_f} \frac{\partial H}{\partial d} dt = 0$$

$$\frac{\partial \omega}{\partial d} + \int_{t_0}^{t_f} \left(\frac{\partial g}{\partial d} + \lambda^T(t) \frac{\partial f}{\partial d} + \varphi^T(t) \frac{\partial q}{\partial d} \right) dt = 0$$

$$x(t_0) - x_0 = 0$$

$$u(t_0) - u_0 = 0$$

Si $S = 0$, entonces:

$$\lambda^T(t_f) = 0$$

Para todo $t \in [t_0, t_f]$. El sistema antes descrito, es discretizado y resuelto por el método de resolución numérica de Newton-Raphson.

$$\dot{x}(t_0) = 0 = f_{\theta(t_0)}(x(t_0), u(t_0), d, t_0)$$

Existen tres categorías de problemas de optimización de columnas de destilación por lotes reportadas en la literatura:

1. Maximizar el flujo de destilado, el cual busca maximizar la cantidad de destilado recuperado con una pureza dada en un tiempo determinado. (Arias Barreto, Rodriguez-Donis, Gerbaud, & Joulia, 2010)
2. Minimizar el tiempo, el cual busca minimizar el tiempo de operación total para producir la cantidad de destilado dado con una pureza dada. (Arias Barreto, Rodriguez-Donis, Gerbaud, & Joulia, 2010)
3. Maximizar beneficios, el cual busca optimizar económicamente una función de costos que incluye contribuciones del tiempo total de operación, cantidad y pureza del destilado. (Arias Barreto, Rodriguez-Donis, Gerbaud, & Joulia, 2010)

Los algoritmos basados en SQP solucionan este problema de dos formas diferentes: utilizando un método de conjunto activo o utilizando funciones de barrera. (Grossmann & Caballero, 2007)

En los métodos de conjunto activo en cada iteración se debe decidir qué subconjuntos de

restricciones son activas. La determinación del conjunto activo es un problema de carácter combinatorio. Sin embargo, una forma relativamente sencilla de determinar el conjunto activo en el punto x^k , consiste en resolver el siguiente problema cuadrático.

$$\min \nabla f(x^k)^T d + \frac{1}{2} d^T L(x^k, \lambda^k, \mu^k) d$$

sujeto a:

$$\begin{aligned} h(x^k) + \nabla h(x^k)^T d &= 0 \\ g(x^k) + \nabla g(x^k)^T d + s &= 0 \quad s \geq 0 \end{aligned}$$

En aquellos problemas donde hay un número pequeño de desigualdades los métodos de conjunto activo suelen dar mejores resultados. Para mejorar la convergencia desde puntos relativamente alejados de la solución se han utilizado dos estrategias: búsqueda unidireccional o el método de la región de confianza. Cada paso se lleva a cabo sólo si se produce una reducción suficiente de una función de mérito (suma ponderada de la función objetivo y alguna medida de la violación de las restricciones del problema). Dos funciones de mérito habituales en SQP son el Lagrangiano aumentado (LA) y la penalización exacta (PE). (Grossmann & Caballero, 2007)

El ambiente escogido para realizar la simulación y posterior optimización dinámica de la columna de destilación fue *Matlab*. Para obtener los resultados de la simulación dinámica de la torre, se utilizó la función *fsolve*, el cual es un solucionador de sistemas de ecuaciones no lineales. Por otro lado, para la optimización dinámica de la columna se utilizó la función *fmincon*, la cual se utiliza para solucionar problemas de optimización no lineales (NLP). Para la optimización, la anterior función utiliza los siguientes algoritmos:

- Trust-region-reflective (Región de confianza)
- Active set (Conjunto activo)
- Interior point (Punto interior)
- SQP (Programación cuadrática sucesiva)

Para la optimización, en este caso se escogió el método de conjunto activo por ser el algoritmo que de manera más eficiente llegaba a una respuesta.

2 OBJETIVOS

2.1 Objetivo general

- Formulación de la optimización dinámica, integrando el diseño y control óptimo por métodos rigurosos de una columna de destilación por lotes.

2.2 Objetivos específicos

- Simulación dinámica la columna de destilación por lotes:
 - ✓ Resolver el sistema de ecuaciones algebraico-diferenciales (DAE).
 - ✓ Confrontar los datos mediante software comercial (Aspen Batch Distillation).
- Desarrollar la función objetivo integral.
- Planteamiento y formulación del problema de optimización de la columna de destilación por lotes.

3 METODOLOGÍA

3.1 Simulación dinámica

Para la inicialización de la simulación dinámica se resolvieron las ecuaciones en estado estable de la columna teniendo en cuenta que no ha salido nada de destilado en ese momento. La resolución de la simulación dinámica se hace con una discretización total que para facilitar su convergencia, se inicializa con los datos obtenidos tras una resolución secuencial de estados cuasi-estacionarios. El tiempo de simulación se toma hasta el instante donde la mezcla es completamente destilada y retirada de la columna.

Para la simulación dinámica se hace el uso de la suposición de sistemas cuasi-estacionarios sucesivos, es decir, que para cada instante de tiempo (nodos), se asume estado estacionario. Para el siguiente intervalo de tiempo, tan solo se ajusta la cantidad de mezcla en el rehervidor y su composición en ese momento.

La simulación dinámica se realizó en *Matlab*®, y se usó la función *fsolve*. Una vez se obtienen los resultados, se realiza una simulación en *Aspen Batch Distillation*® y se procede a realizar una comparación de los resultados.

3.2 Planteamiento del problema de optimización

Para el planteamiento de la optimización se tienen todas las ecuaciones de la columna de destilación para todos los nodos dentro del intervalo de optimización, luego de la discretización total. En pocas palabras, el problema de optimización dinámico se convierte en una optimización no lineal (NLP). Por lo que se usarán algoritmos para la resolución de este problema de optimización. A continuación se presentan las dos funciones objetivo que fueron analizadas y cuyos resultados tras la optimización se presentan más adelante:

$$\max_{Q_B, R} \int_{t_f=0}^{t_f=1} D(Q_B, R) dt$$

$$\max_{Q_B, R} \int_{t_f=0}^{t_f=1} (C_1 * F - D * 0.95 * C_2 + C_3 * (Q_B + Q_C)) dt$$

Sujeto a:

Ecuaciones de la (1) a la (27)

$$\frac{\int_{t_f=0}^{t_f=1} x_{D,propano} D(Q_B, R)}{\int_{t_f=0}^{t_f=1} D(Q_B, R)} \geq 0.95$$

Donde C_1 es el precio de la mezcla que se alimenta a la torre inicialmente y tiene un valor de US\$5/kmol. F es la cantidad de la mezcla alimentada en kmol/hr. D es el flujo de destilado que abandona la torre en kmol/hr. C_2 es el precio del propano, US\$32.7077/kmol. C_3 es el precio de ambos servicios que corresponde a US\$0.1/GJ. El precio del propano se obtuvo de *indexmundi*¹. Los demás precios fueron supuestos dada la naturaleza de esta investigación.

Las restricciones de igualdad, corresponden a especificaciones o requerimientos y las ecuaciones que determinan la dinámica de la columna de destilación por lotes. Por otro lado, la restricción de desigualdad es la condición de pureza en el destilado.

¹ <http://www.indexmundi.com/es/precios-de-mercado/?mercancia=propano&meses=60>, Precio de propano en el mercado, Noviembre del 2011.

3.3 Estrategia de solución

El problema de optimización dinámico (DO) se convierte en un problema no lineal (NLP), mediante la discretización de las ecuaciones diferenciales y la suposición de estados de cuasi-equilibrio; luego se resuelve el problema NLP con el método de conjunto activo.

Para la optimización, se tiene que las variables por optimizar son la potencia del rehervidor y la relación de reflujo. Por ahora no se abordará el problema de optimizar el tiempo de operación ni el número de etapas teóricas para conseguir un flujo de destilado con una pureza determinada, debido a que al agregar esta última, el problema se convierte ahora en un problema de optimización de tipo MINLP.

3.4 Análisis de sensibilidad

Una vez se tiene la respuesta de la optimización, se procede a realizar un análisis post-optimal, en el cual se varía el perfil óptimo obtenido de la relación de reflujo y de la potencia del rehervidor y se observa si mejora o no la función objetivo, aun cumpliendo con las restricciones de igualdad y desigualdad.

4 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

El tiempo de simulación es de 748.954465 segundos lo que equivale a 12 minutos y 30 segundos, en una computadora con procesador *Intel core i5 de 2.53 GHz* con *3.8 GB* de memoria RAM.

La *ilustración 2* muestra el perfil de composiciones del destilado en función del tiempo obtenida tras la simulación en *Matlab®*, el cual muestra porque es mejor separar con la destilación por lotes no con la destilación continua. Lo anterior se debe a que con la destilación por lotes se separa componente por componente, según el tiempo de operación de la columna, mientras que con la destilación continua se necesita un tren de columnas de destilación para separar la mezcla componente por componente, debido a que en cada columna continua se separa tan solo un componente.

El tiempo de la simulación dinámica, que es el tiempo en el que se agota la mezcla en el rehervidor es de 2.7 horas aproximadamente, según la simulación realizada en *Matlab®*.

En la *ilustración 3* se puede apreciar el mismo perfil de composiciones de destilado en función del tiempo obtenido en *Aspen Batch Distillation®*. Como es notorio, el perfil de la *ilustración 2* y el presentado en la *ilustración 3* tienen la misma tendencia y solo tiene una diferencia en el tiempo de

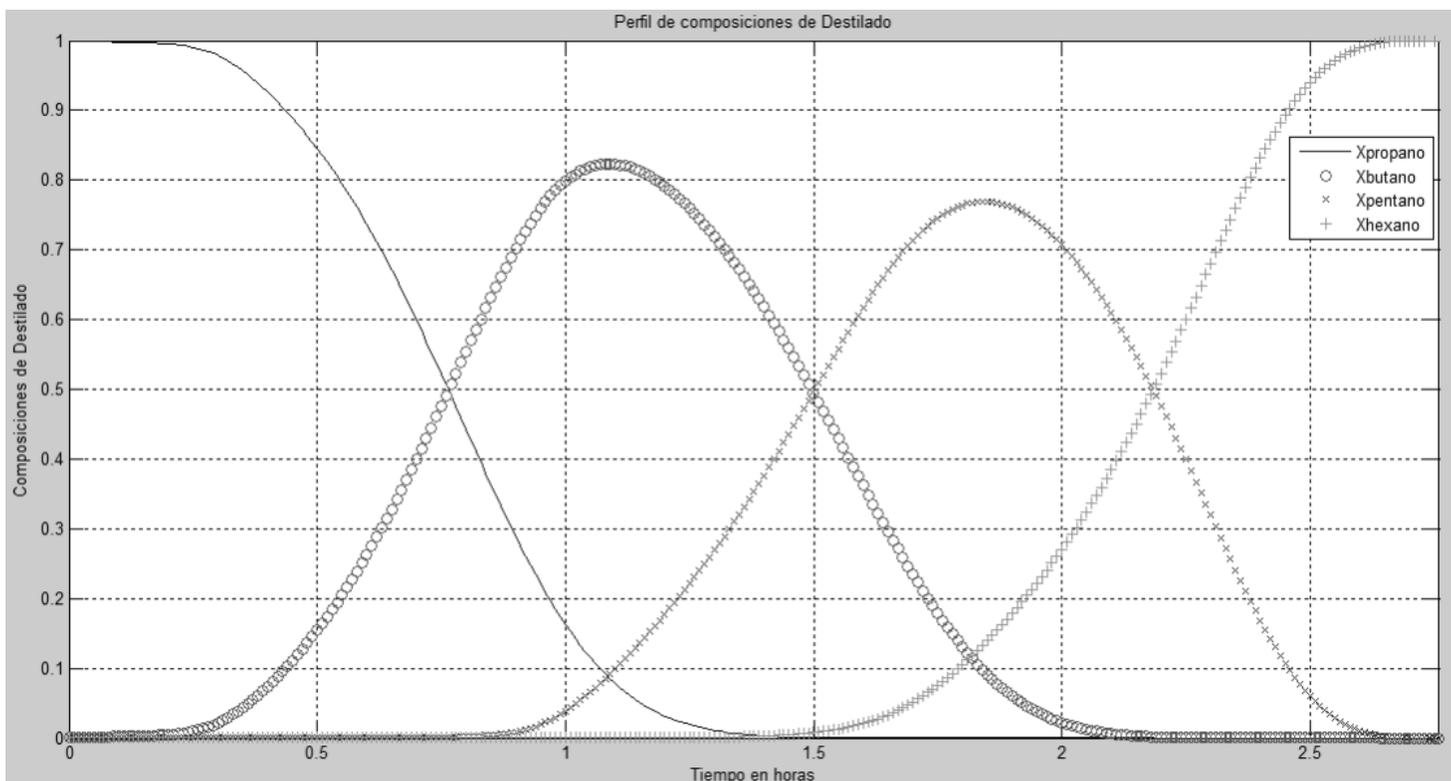


Ilustración 2. Perfiles de composiciones de destilado en función del tiempo (*Matlab®*)

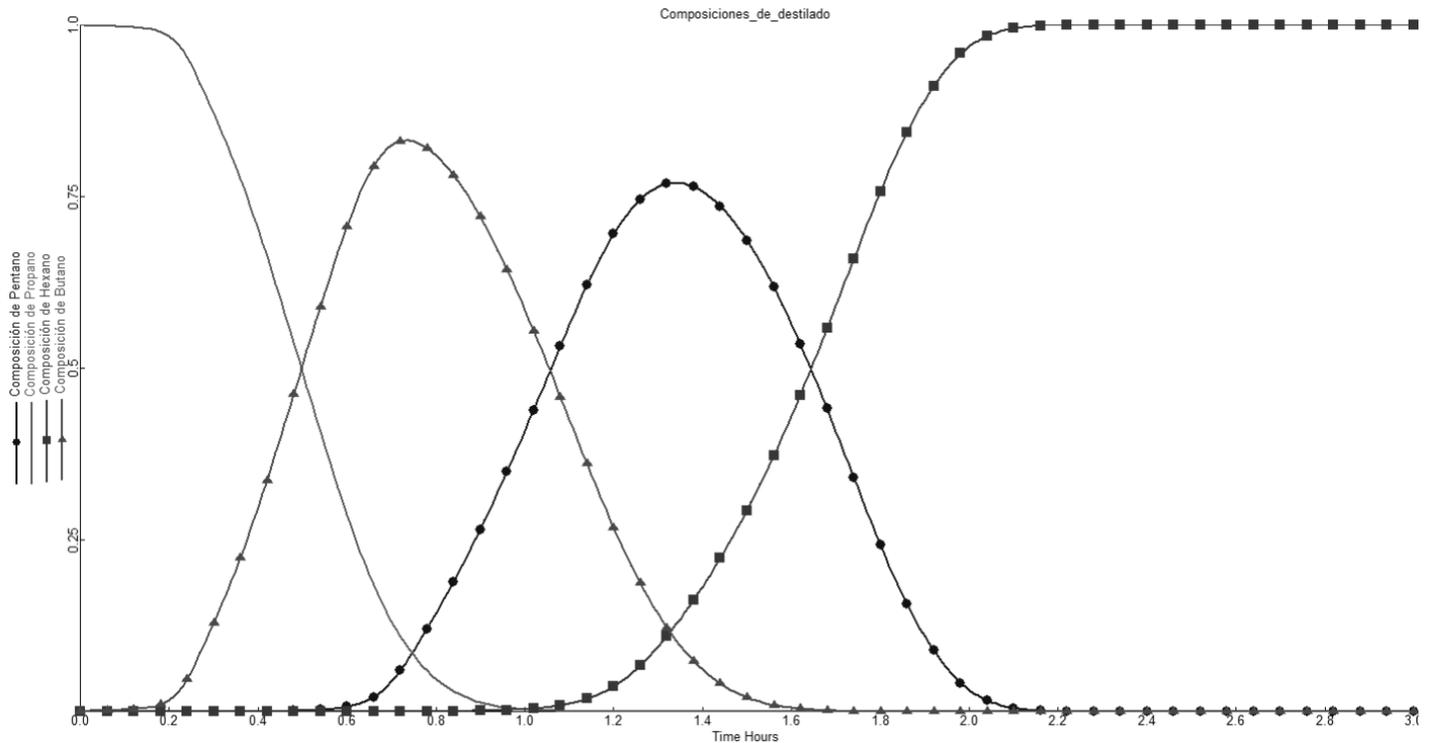


Ilustración 3. Perfiles de composiciones de destilado en función del tiempo (Aspen Batch Distillation®)

finalización de la simulación (Tiempo en que se agota el alimento), debido a los valores de inicialización que utilizan ambos programas.

Según la literatura, los perfiles que se obtuvieron son los que experimentalmente se esperarían.

Para la simulación dinámica de la torre tomando 30 nodos se tenían 2604 ecuaciones y variables que

se debían resolver de manera simultánea. Para la optimización dinámica de la torre se tomaron 20 nodos, para un total de 1764 variables para 1722 ecuaciones, en otras palabras se tenían 42 grados de libertad correspondientes a los valores de potencia del rehervidor y relación de reflujo en cada nodo.

Tras realizar la optimización varias veces, se

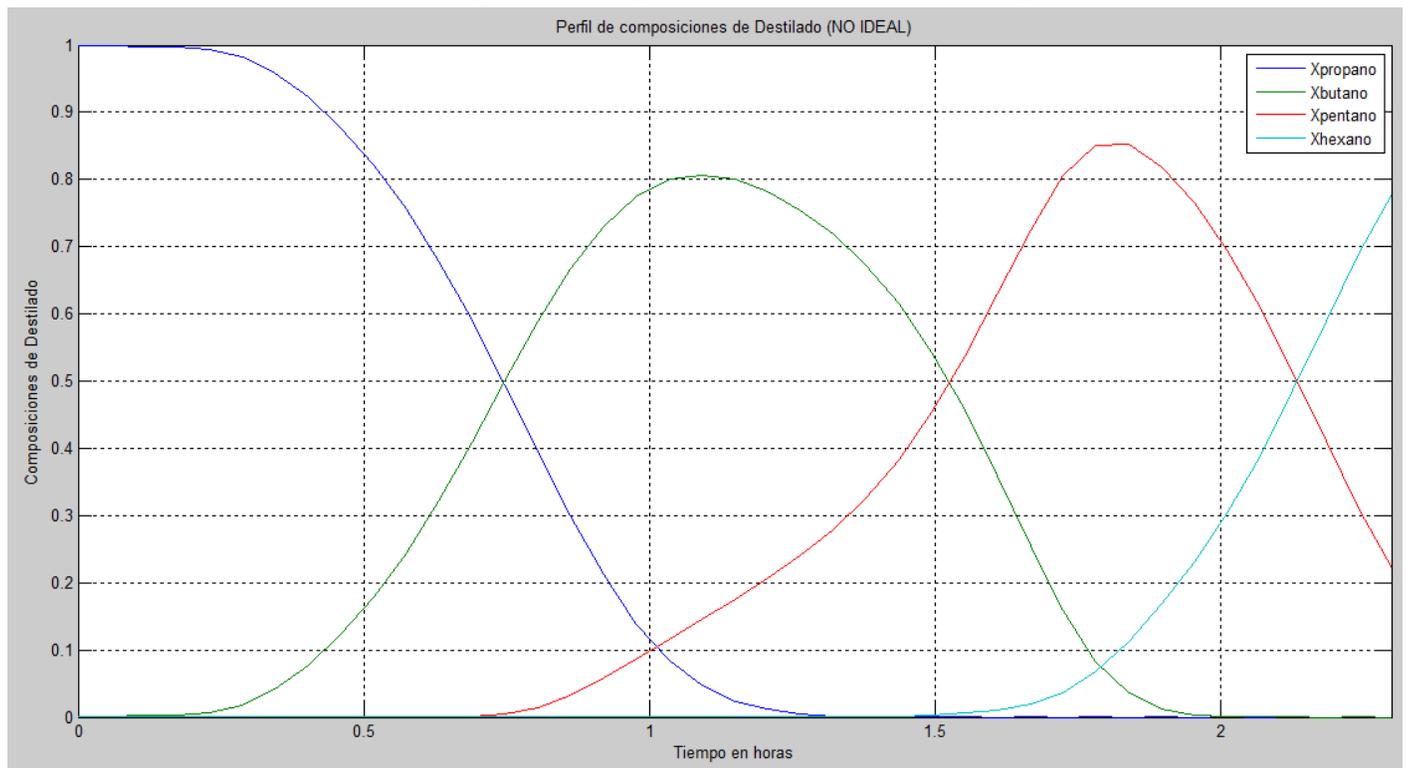


Ilustración 4. Perfil de composiciones de destilado en función del tiempo para el sistema no ideal

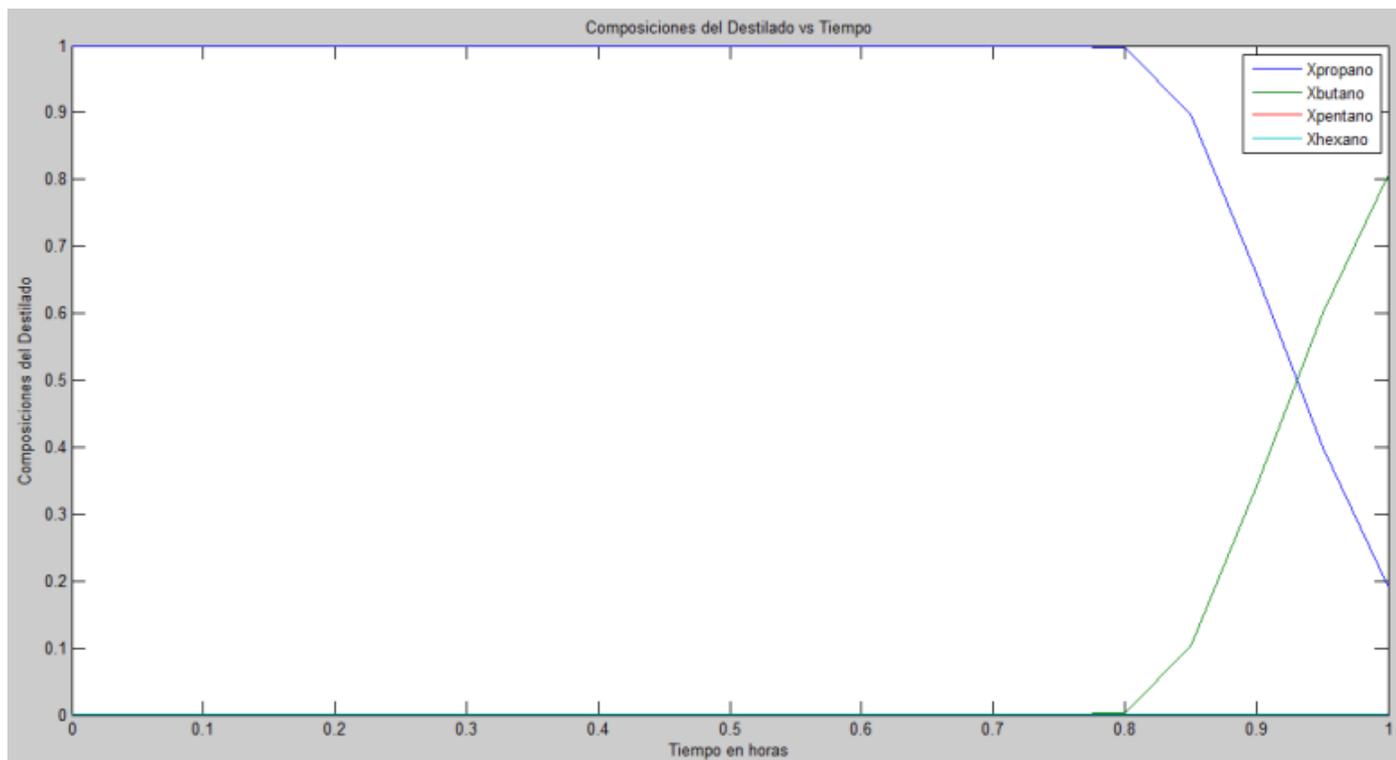


Ilustración 5. Composiciones molares del flujo de destilado tras la optimización

logró constatar que la inicialización de las variables llevaba a obtener diferentes puntos que podrían llamarse “óptimos”, sin embargo tras análisis de sensibilidad en las variables, se determinaron que alguno eran tan solo puntos de inflexión, mientras que el punto “óptimo” que sí correspondió a un máximo, es el que se presenta a continuación.

Para la inicialización del problema de optimización de la columna de destilación se resolvió el modelo tomando 0.4 GJ/hora como potencia del rehervidor y una relación de reflujo de 5 en todos los nodos.

Lo anterior, arrojó en un tiempo de cómputo de 2565 segundos (aproximadamente 43 minutos), un valor de la función objetivo de 2.61 kmol en la hora de operación de la columna. Que efectivamente corresponde a casi todo el propano que se encontraba en la mezcla al inicio de la destilación. La restricción de desigualdad tomó un valor de -1.6764×10^{-14} , mientras que todas las restricciones de igualdad se encontraron en un orden de magnitud cercano a 10^{-6} .

En la *ilustración 4* se presenta el perfil de composiciones de destilado tras incluir el cálculo de los coeficientes de actividad y por ende la no idealidad del líquido de la mezcla de trabajo.

Como se puede apreciar, el comportamiento es similar a la simulación suponiendo la idealidad de la fase líquida, sin embargo se puede ver que la diferencia más grande entre los perfiles obtenidos es el comportamiento de la composición de pentano. La cual suponiendo idealidad, su máximo en la gráfica se encontraba por debajo del máximo de la curva de la fracción de butano, en cambio en el perfil tras incluir la no idealidad, se tiene que su máximo se encuentra por encima del máximo del perfil de composiciones de butano.

En la *ilustración 5* podemos observar que la composición de propano a lo largo de casi todo el tiempo de operación de la columna de destilación por lotes, es máximo. Sin embargo, al finalizar la destilación, esta composición es cercana a 0.2 debido a que para este tiempo y con estas condiciones, ya casi todo el propano en la mezcla inicial ha sido separado.

En la *ilustración 7* se puede ver como es el perfil óptimo de la potencia del rehervidor incluyendo la no idealidad a la fase líquida. Allí se puede apreciar que este tiene una disminución en la parte final de la operación como respuesta para mantener la composición de propano en el destilado lo más alta posible.

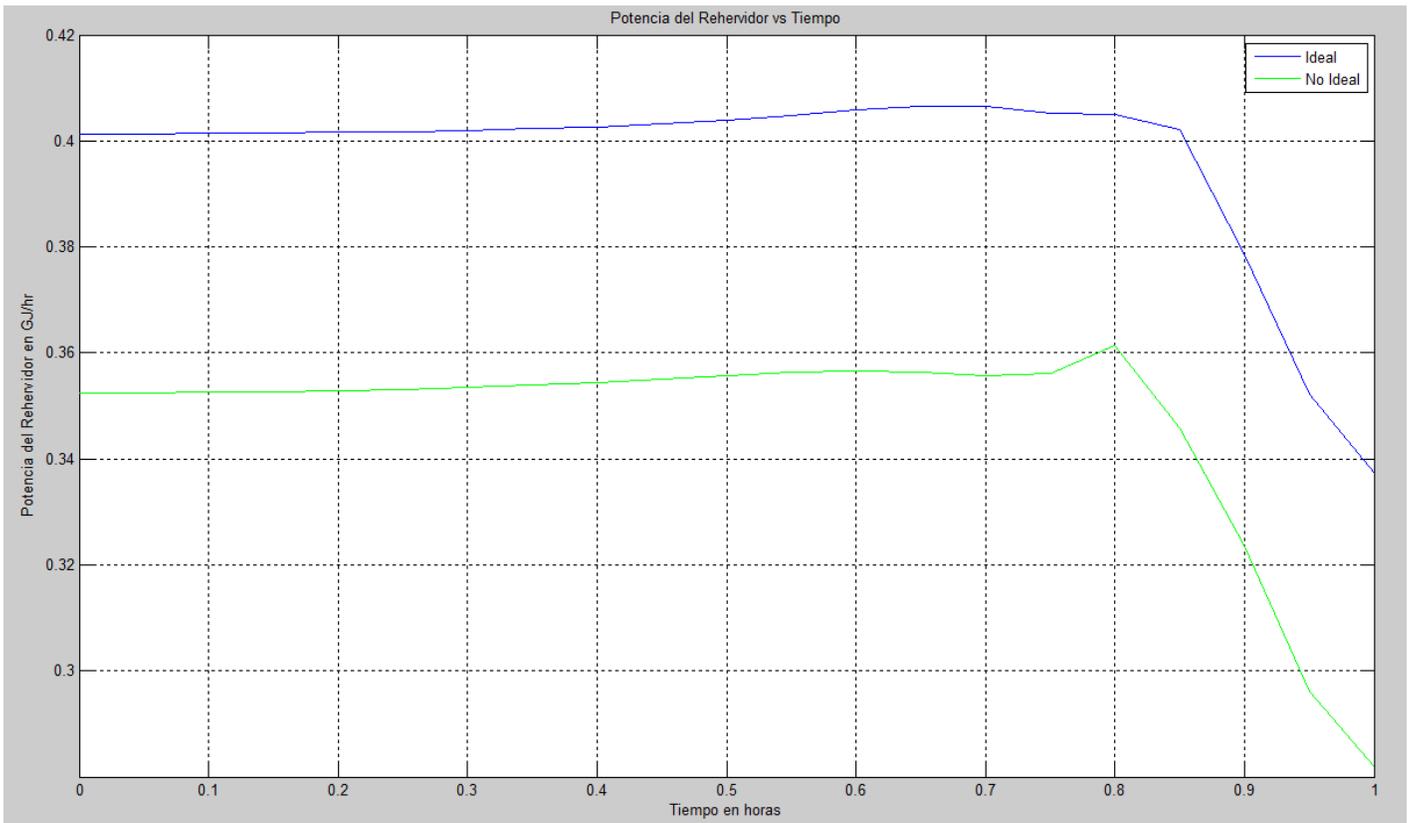


Ilustración 7. Perfil óptimo de la potencia del rehervidor en función del tiempo

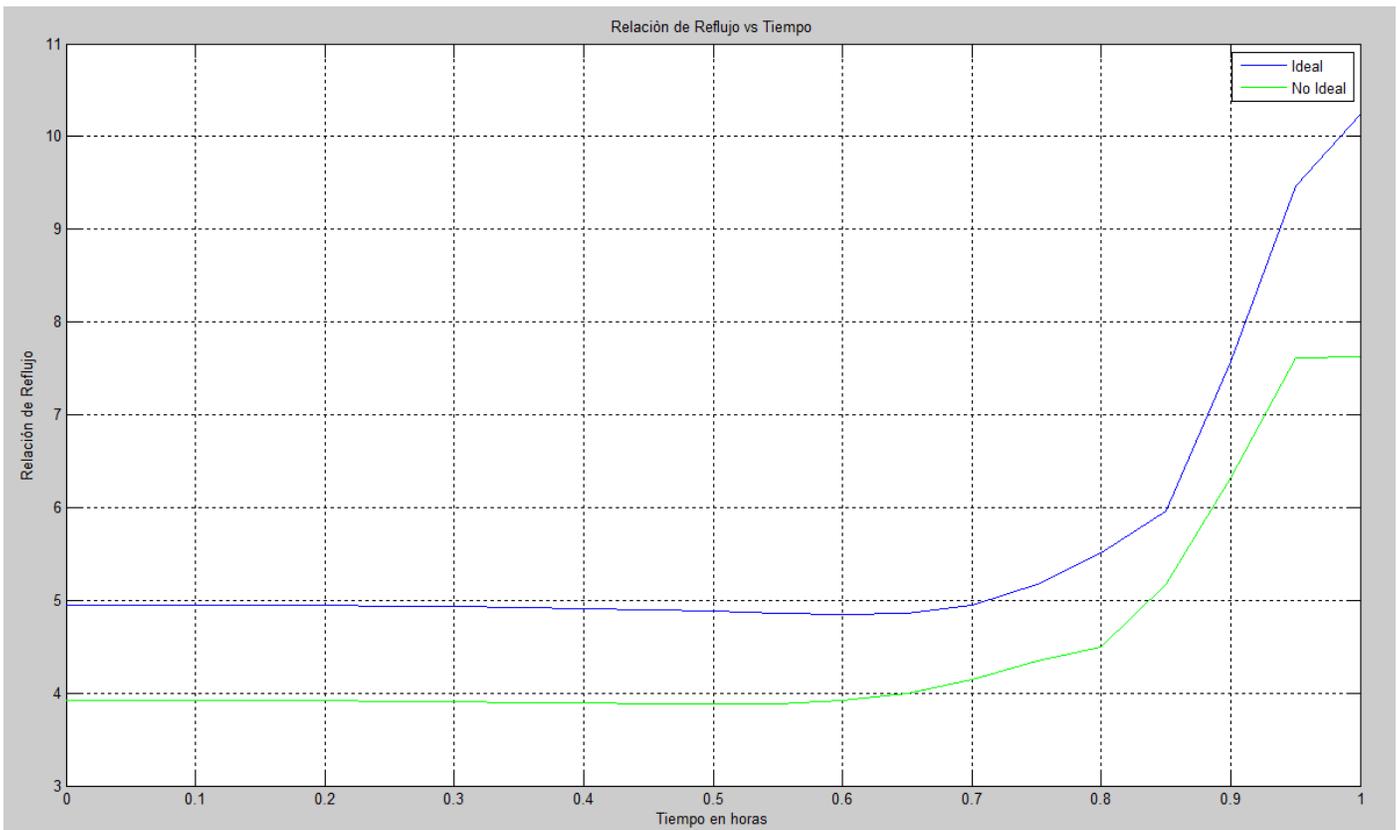


Ilustración 6. Perfil óptimo de la relación de reflujo en función del tiempo de operación

En la *ilustración 6* muestra el perfil óptimo de la relación de reflujo, en el cual se puede evidenciar

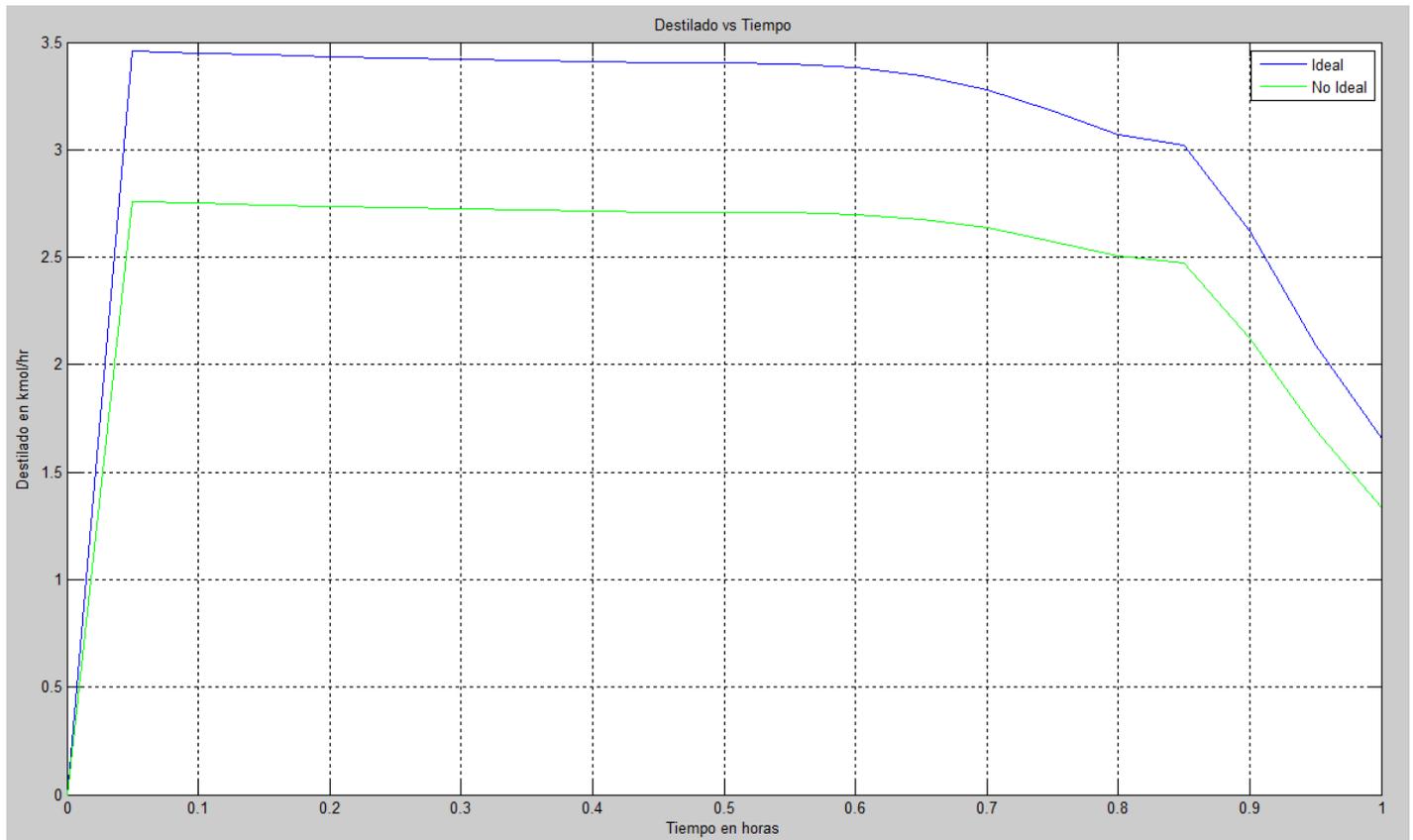


Ilustración 8. Flujo de destilado óptimo en función del tiempo de operación luego de la optimización

que la respuesta dinámica y mecánica para mantener la composición de propano en el destilado más alta, es la de aumentar la relación de reflujo, lo que ocasiona un decremento en el flujo de destilado tal y como se aprecia en la *ilustración 8*.

En la *ilustración 8* se muestra cómo varía el flujo de destilado en función del tiempo y la diferencia entre la suposición de ideal y la adición del cálculo del coeficiente de actividad.

Como se puede apreciar en los anteriores perfiles, las gráficas que se generan cuando se incluye la no idealidad del sistema, son inferiores en cuando a su magnitud de en términos generales siguen el mismo comportamiento de las curvas obtenidas suponiendo idealidad de la fase líquida. Lo anterior se debe a que la restricción de equilibrio en el sistema se está modificando al incluir el coeficiente de actividad.

Sin embargo, cabe añadir que el valor de la función objetivo, -2.5985, se desmejoró pero no significativamente, por lo que se puede decir que la suposición de idealidad de la fase líquida no estaba tan alejada de la realidad. Además de lo anterior se tuvo un tiempo de cómputo de 1 hora y 30 minutos aproximadamente; casi el doble del tiempo de

cómputo que se tuvo para la optimización asumiendo idealidad.

Tabla 10. Análisis de sensibilidad de los perfiles óptimos obtenidos

	Función objetivo	Restricción de desigualdad	Restricción de igualdad	Tiempo de simulación en segundos
R * (0.95)	-2.6852	0.0251	$\sim 1.0 * 10^{-8}$	409.202667
R * (1.05)	-2.5421	-0.0225	$\sim 1.0 * 10^{-8}$	425.262392
QB * (1.05)	-2.7286	0.0390	$\sim 1.0 * 10^{-8}$	618.214474
QB * (.95)	-2.4962	-0.0345	$\sim 1.0 * 10^{-8}$	676.533954

En la tabla anterior se muestran los resultados de los análisis de sensibilidad realizados sobre los perfiles óptimos obtenidos. Allí se puede apreciar que al modificar el reflujo se aumenta la función objetivo pero se tiene que la restricción de desigualdad se deja de cumplir, caso similar ocurre al modificar el perfil de la potencia del rehervidor en la que se mejora la función objetivo pero no se cumple con la restricción de desigualdad.

Para la optimización con la segunda función objetivo, se tiene un tiempo de cómputo de 3 horas y 13 minutos aproximadamente. En este tiempo se alcanza una función objetivo de US\$-29.9151 y

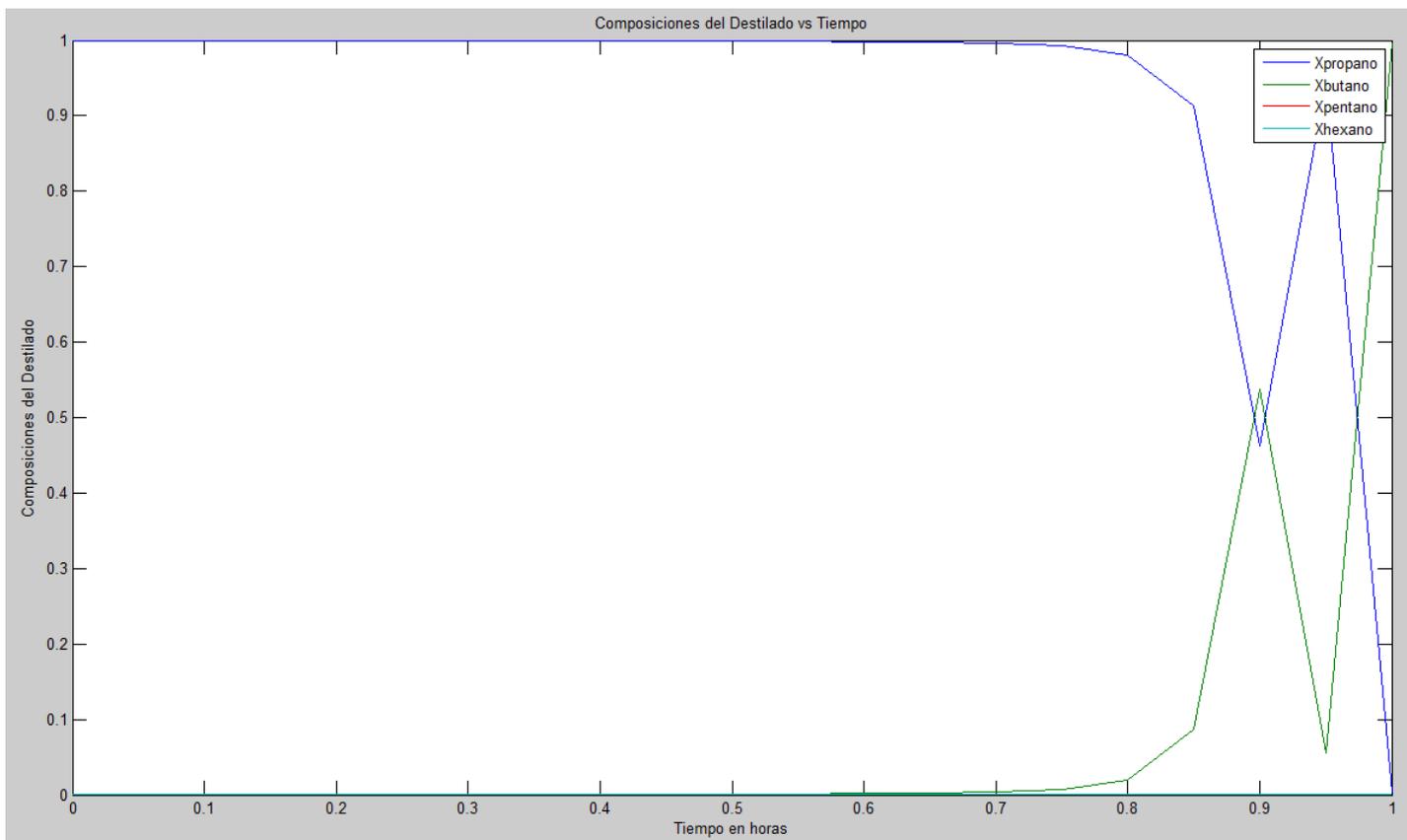


Ilustración 10. Perfil de composición de destilado óptimo en función del tiempo para el segundo problema de optimización

todas las restricciones de igualdad se cumplen y la restricción de desigualdad se satura. Para la elaboración de la función objetivo se consultó el valor actual de propano y en base a este se especificaron los valores de la mezcla alimentada en

la columna y los servicios.

En la *ilustración 10* se tiene el perfil de composiciones de destilado en función del tiempo tras realizar la optimización con la función objetivo económica.

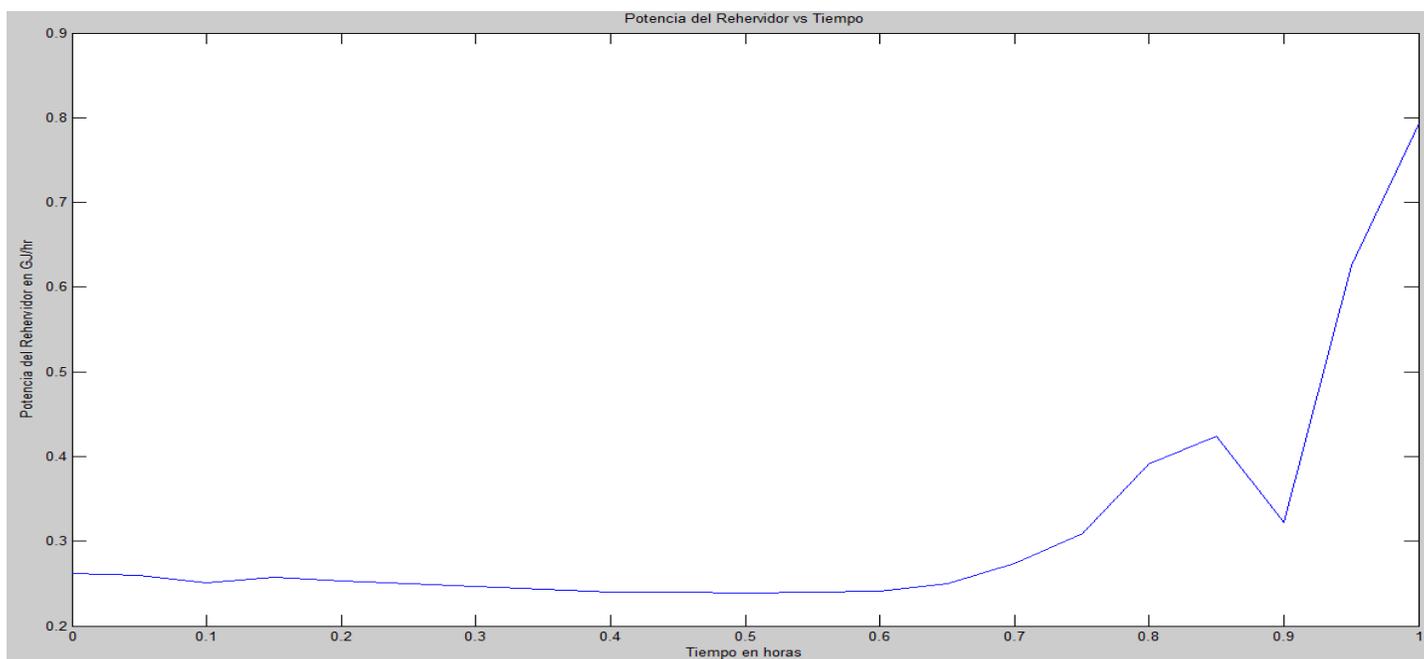


Ilustración 9. Perfil óptimo de potencia del rehevidor en función del tiempo para el segundo problema de optimización

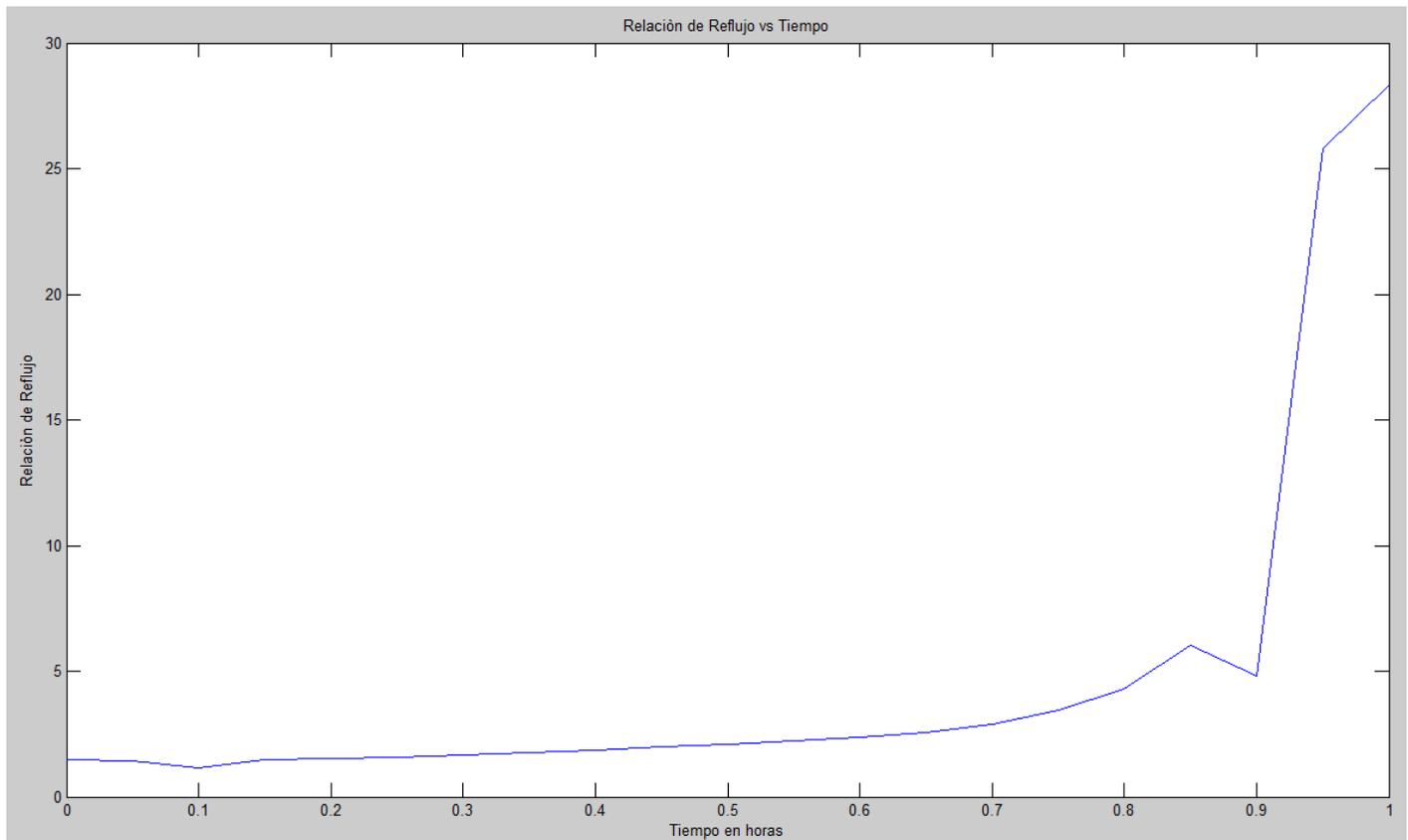


Ilustración 12. Perfil de relación de reflujo en función del tiempo obtenido tras la optimización con la segunda función objetivo

En la *ilustración 9* se muestra la potencia del rehervidor en función del tiempo en la cual se obtiene de cierta manera lo que se espera, debido a

que al finalizar el tiempo de operación se tiene un incremento en el valor de la potencia del rehervidor para mantener la restricción de desigualdad, pero de

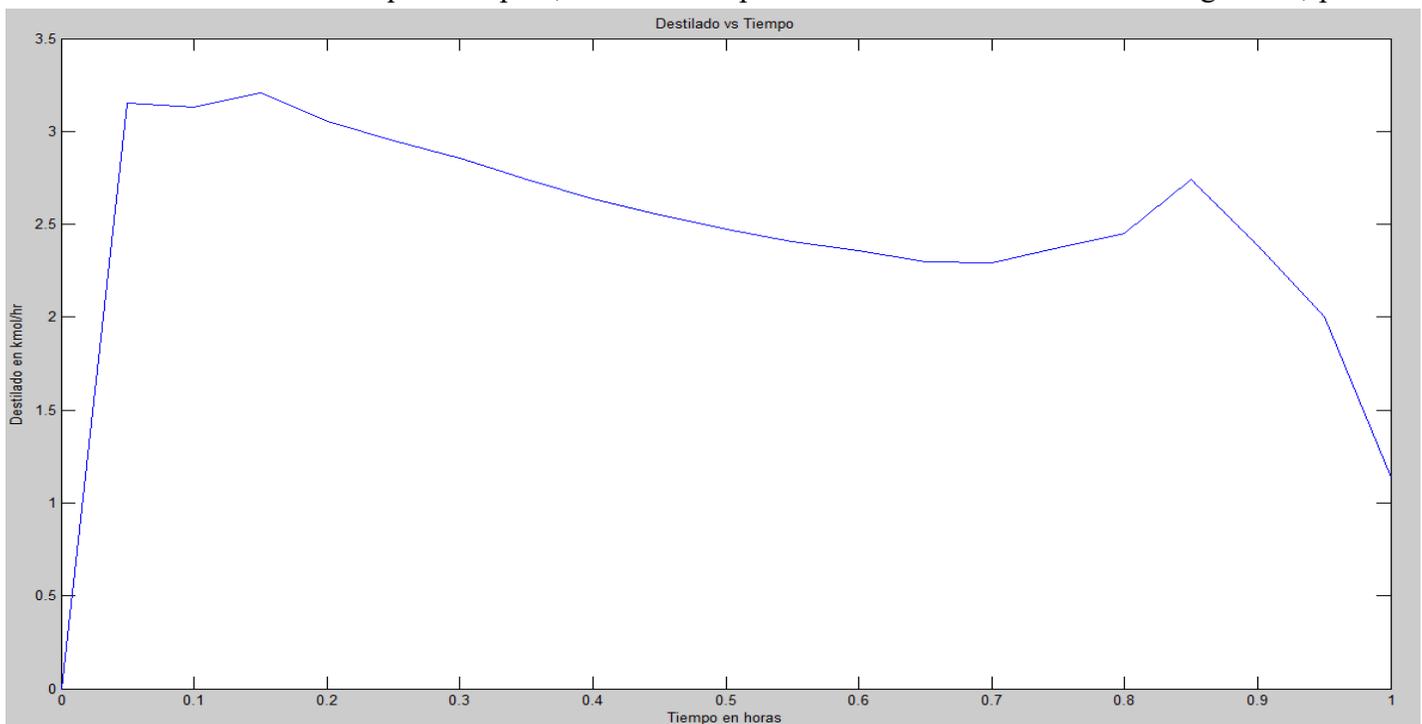


Ilustración 11. Flujo de destilado obtenido tras la optimización con la segunda función objetivo

igual manera procurando disminuir el consumo de servicios, tanto en el rehervidor como en el condensador.

En la *ilustración 12* se tiene el perfil de relación de reflujo el cual muestra el comportamiento de la relación de reflujo para mantener la restricción de desigualdad y obtener la cantidad máxima de destilado con bajos servicios.

En la *ilustración 11* se tiene el flujo de destilado óptimo, en el cual se puede observar un comportamiento diferente a la obtenida sólo maximizando el flujo de destilado. Dicha desviación es en gran medida causada por el hecho de minimizar los costos asociados a los servicios y aún así mantener la restricción de desigualdad.

5 CONCLUSIONES

- La destilación por lotes es una muy buena opción con respecto a la destilación continua, cuando se tienen mezclas multicomponentes que se desean separar cada componente; debido a que con la destilación continua se necesitarían un tren de columnas de destilación.
- La simulación dinámica de la torre de destilación por lotes aproximándolo a sistemas cuasi-estacionarios consecutivos es una buena aproximación para acercarse al comportamiento dinámico de manera relativamente rápida y eficiente computacionalmente.
- Debido a la gran cantidad de ecuaciones que hay que resolver de manera simultánea, se requieren equipos que sean computacionalmente eficientes para realizar la optimización.
- Dada las variables que se manejan en la simulación y optimización, 2604 y 2644 respectivamente, el ambiente de programación (Matlab) tiene tiempos de cómputo relativamente grandes con respecto a otros problemas de magnitudes mayores desarrollados en GAMS.
- Los resultados obtenidos en la optimización son acordes a lo que se esperaba, además de ser consistentes físicamente.
- Tras realizar el análisis de sensibilidad en ambos casos se determinó que se cuenta con un óptimo local.

- Tras incluir corrección por idealidad no se alteró significativamente el tiempo de cómputo tanto en la simulación como en la optimización, además se obtuvieron nuevos perfiles que a groso modo se puede decir que tienen un comportamiento similar pero tienen valores diferentes.
- Aunque se obtuvieron resultados tras la optimización de la segunda función objetivo y se puede decir que es un óptimo local tras realizar un análisis de sensibilidad, se debe posteriormente mirar cuál es la incidencia que tiene los costos especificados sobre los perfiles óptimos obtenidos.
- Tras observar los resultados de las maximizaciones del destilado, se puede llegar a pensar que dado que los perfiles obtenidos y el valor de las funciones objetivo, se está sacrificando bastante tiempo de cómputo (casi el doble), tras incluir la no idealidad del sistema que en términos generales no contribuye una variación significativa en el valor de la función objetivo ni en los perfiles obtenidos.

6 PERSPECTIVAS

En cuanto a los objetivos del proyecto, la formulación de la optimización dinámica ya ha sido realizada, pero de una manera simplificada, pues por ahora no se ha integrado el diseño. Es decir, que lo que se quiere obtener en primera instancia, son los perfiles óptimos de la potencia del rehervidor y de la relación de reflujo, para maximizar el flujo de destilado bajo una restricción de pureza. En una segunda instancia, se minimizó una función de costos básica, sin embargo para un trabajo futuro se debe hacer más robusta esta función objetivo con datos reales y no ajustados.

Lo que sigue para el proyecto en futuros trabajos es añadir a la función objetivo integral, la parte económica y hacer la optimización de esta manera. Luego corregir la idealidad que se introdujo a este modelo, en la medida de introducir ecuaciones para predecir la retención de líquido en cada plato. Además de introducir como variable a optimizar el tiempo de cada lote. Y asumir que hay una caída de presión a lo largo de la columna.

Es necesario ahora, tal y como se hizo con el propano, optimizar las condiciones de operación

para separar los otros compuestos de la mezcla resultante; que eventualmente pueden ser separados en esta misma columna de destilación, simplemente modificando los perfiles de potencia del rehervidor, y la relación de reflujo así como el tiempo de operación de la torre por lotes.

Realizar un análisis de sensibilidad sobre los perfiles al modificar los costos de los servicios y la mezcla inicial en la función objetivo (precios). Además se debe responder la siguiente pregunta: ¿Por qué no se encuentra una respuesta cuando se tienen servicios muy costosos?

Averiguar sobre por qué los algoritmos de solución SQP y punto interior se quedan cortos en este tipo de problema. Además de por qué con conjunto activo se tiene una mejor respuesta que los algoritmos mencionados a continuación.

Se debe escoger un algoritmo de resolución para el problema de optimización no lineal, lo suficiente potente para este problema. Además se propone migrar a otro ambiente de programación especializado como GAMS.

7 NOTACIÓN

L_c : Flujo de reflujo (kmol/h)

R : Relación de reflujo

h : Intervalos de tiempo (horas)

M_B^j : Retención en el rehervidor en el nodo j (kmol)

L_c^j : Flujo de reflujo (kmol/h) en el nodo j (kmol/hora)

L_i : Flujo de líquido en el plato i (kmol/hora)

V_i : Flujo de Vapor en el plato i (kmol/hora)

$x_{i,j}$: Composiciones de líquido del componente i en la etapa j

$y_{i,j}$: Composiciones de vapor del componente i en la etapa j

$K_{i,j}$: Coeficientes de equilibrio termodinámico

h_i^l : Entalpías de líquido en la etapa i (J/Kmol)

h_i^v : Entalpías de vapor en la etapa i (J/Kmol)

Q_B : Potencia del rehervidor GJ/hr

Q_c : Potencia del condensador GJ/hr

P : Presión de operación de la torre (bar)

$P_{i,j}^{sat}$: Presión de saturación del componente i en la etapa j (bar)

$\gamma_{(i,j)}$: Coeficiente de actividad del componente i en la etapa j

C_p : Capacidad calorífica a presión constante (J/molK)

R_g : Constante universal de gases ideales (J/molK)

α_i : Coeficientes polinómicos para el cálculo del C_p

T_i : Temperatura en la etapa i (K)

$h_{v,i}^\circ$: Entalpía estándar de vapor en la etapa i (J/kmol)

$h_{l,i}^\circ$: Entalpía de líquido estándar de la etapa i (J/kmol)

ΔH_i^{vap} : Calor de vaporización del componente i (J/kmol)

M_B : Retención de mezcla en el rehervidor (kmol)

8 BIBLIOGRAFÍA

1. Arias Barreto, A., Rodriguez-Donis, I., Gerbaud, V., & Joulia, X. (s.f.). Optimization of Heterogeneous Batch Extractive Distillation. *Industrial & Engineering Chemistry Research*.
2. Khazraee, S M, Jahanmiri, A H, & Ghorayshi, S A. (2011). Model reduction and optimization of reactive batch distillation based on the adaptive neuro-fuzzy inference system and differential evolution. *Neural Comput & Applic*, 239–248.
3. Low, K. H., & Sorensen, E. (2004). Simultaneous optimal design and operation of multipurpose batch distillation columns. *Chemical Engineering and Processing*, 273–289.
4. Miranda, M., Renuaume, J., Meyer, X., Meyer, M., & Szigeti, F. (2008). Integrating process design and control: An application of optimal control to chemical processes. *Chemical Engineering and Processing*, 2004–2018.
5. Morel, B. (2008). Optimal Control And Dynamic Optimization. En U. Diwekar, *Introduction to Applied Optimization*. Springer Science+ Business Media, LLC.
6. Mujtaba, I. (2004). *Batch Distillation: Design and Operation*. London, UK: Imperial College Press.
7. Poling, Bruce E, & Prausnitz, John M. (2001). *THE PROPERTIES OF GASES AND LIQUIDS*. New York: McGRAW-HILL.
8. Seader, J. D. (2006). *Separation process principles*. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons.

Grossmann, I. E., & Caballero, J. A. (2007). UNA REVISIÓN DEL ESTADO DEL ARTE EN OPTIMIZACIÓN. *Revista Iberoamericana de automática e informática industrial*, 5-23.